

GRUPO DE PESQUISA

ENGENHARIA DE MATERIAIS

LÍDER: Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

INTEGRANTES: Dr. Basílio Baseia, Dr. Francisco Aparecido Pinto Osório, Prof. Adailton Neres de Castro, Profa. Daphne Cristine Fernandes, Prof. Florisberto Garcia dos Santos, Prof. Sizelizio Alves de Lima e Castro e João Victor Batista Soares

O Grupo de Pesquisa em Engenharia de Materiais (GPEM) foi instituído em 2018, na cidade de Goiânia, Goiás. Originalmente circunscrito às áreas de Engenharia, Química e Física, o GPEM tem como propósito atuar no desenvolvimento e na aplicação de métodos de mecânica quântica molecular na modelagem de sistemas orgânicos de interesse tecnológico.

O GPEM dedica-se à síntese, à determinação experimental, à modelagem e ao desenvolvimento de métodos de cálculo que possibilitem a descrição meticulosa das propriedades de sistemas moleculares reais. Nossa principal ênfase recai sobre a simulação de dinâmica molecular quântica, empregando DFT via Gaussian ou ondas planas via SIESTA ou VASP. Ademais, atuamos na determinação experimental de estruturas cristalinas mediante a difração de raios X, com impacto direto no desenvolvimento de novos compostos e nas ciências dos materiais.

O GPEM objetiva dar continuidade aos estudos recentemente desenvolvidos, submetidos e publicados, nos quais nos dedicamos aos cálculos de propriedades lineares e não lineares de novos cristais orgânicos sintetizados em laboratório, preparados por diversas técnicas e determinados estruturalmente por raios X, utilizando variadas metodologias e abordando diferentes tipos de cristais. O escopo desses

cálculos abrange duas vertentes: a primeira consiste em compreender as características de novos cristais orgânicos a partir de primeiros princípios, seu comportamento diante da ação de campos elétricos externos, estáticos e dinâmicos, e como esses campos afetam o cristal com respeito ao seu caráter anisotrópico; a segunda vertente envolve a busca por propriedades de destaque, de interesse aplicativo.

Em 2025, o Grupo de Pesquisa em Engenharia de Materiais (GPEM) passou a organizar sua apresentação institucional a partir de três eixos centrais: a discriminação dos projetos realizados e/ou em andamento; a seleção das publicações mais relevantes do ano; e a identificação das parcerias científicas existentes. Essa reorganização confere maior objetividade ao relatório, facilita a avaliação institucional da produção anual e evidencia a consolidação do grupo em pesquisas sobre materiais orgânicos, sistemas supramoleculares, propriedades ópticas não lineares e aplicações tecnológicas avançadas.

DISCRIMINAÇÃO DOS PROJETOS REALIZADOS E/OU EM ANDAMENTO EM 2025

1. Projeto em propriedades ópticas não lineares de cristais e sistemas orgânicos: continuidade dos estudos teóricos e computacionais voltados à determinação de polarizabilidades, hiperpolarizabilidades e suscetibilidades ópticas, com ênfase na resposta de materiais orgânicos sob campos elétricos estáticos e dinâmicos.

2. Projeto sobre sistemas supramoleculares e mecanoluminescência: investigação estrutural e computacional de sistemas auto-organizados, especialmente compostos baseados em piperazina, com avaliação de propriedades mecanoluminescentes e de potencial aplicação em materiais funcionais.

3. Projeto sobre derivados de dihidropiridina em meios solventes: estudo experimental e teórico envolvendo síntese, caracterização fotofísica e avaliação das propriedades ópticas não lineares em diferentes ambientes solventes, integrando modelagem molecular e análise espectroscópica.

4. Projeto sobre cristais orgânicos com potencial para memória quântica: investigação teórica da suscetibilidade óptica de terceira ordem em cristal de metronidazolium-picrate, com análise de seu potencial para aplicações em armazenamento e processamento de informação quântica.

5. Projeto sobre benzaldeídos bromados e modelagem molecular: estudo integrado de síntese, caracterização e modelagem de dimetoxibenzaldeídos bromados, com foco na relação entre estrutura molecular, substituição halogenada e resposta óptica não linear.

6. Projeto interdisciplinar em educação inclusiva e formação científica: desenvolvimento de produção acadêmica voltada à compreensão das múltiplas dimensões do autismo, reforçando a atuação do grupo também em ações de formação, inclusão e difusão do conhecimento científico.

As publicações de 2025 demonstram a maturidade científica do GPEM, com presença em periódicos internacionais relevantes e manutenção de colaborações nacionais e estrangeiras. Entre os trabalhos mais significativos do ano, destacam-se:

VIEIRA, I. H. M. de O.; VALVERDE, C. "Além do rótulo": explorando as diversas dimensões do autismo. **Revista Educação em Contexto**, Goiânia, v. 4, n. 1, p. 99-114, 2025.

POTLA, K. M.; VANKAYALAPATI, S.; OSÓRIO, F. A. P.; VALVERDE, C.; MURUGESAN, R.; ALMARHOON, Z. M.; ALAM, M.; ISLAM, M. S. Mechanoluminescence and nonlinear optical properties of a self-assembled piperazine-based supramolecular system: structural insights and computational analysis. **New Journal of Chemistry**, v. 49, n. 28, p. 12439-12452, 2025.

KARMAKAR, S.; VALVERDE, C.; OSÓRIO, F. A. P.; DEY, S.; PODDER, S.; CHATTERJEE, A. Experimental and theoretical investigation of a novel dihydropyridine derivative: Synthesis, photophysical characterization, and enhanced nonlinear optical properties in solvent media. **Journal of Molecular Structure**, v. 1348, p. 143444, 2025.

VALVERDE, C. A Theoretical Investigation of Third-Order Optical Susceptibility in Metronidazolium-Picrate Crystal and Its Potential for Quantum Memory Applications. **ACS Omega**, v. 10, n. 34, p. 38731-38739, 2025.

VALVERDE, C.; BORGES, I. D.; PRAZERES, M. A.; AGUIAR, A. S. N.; NAVARRETE,

A.; AGUIRRE, G.; OSÓRIO, F. A. P.; NAPOLITANO, H. B. Exploring the NLO Properties of Brominated Dimethoxybenzaldehydes: From Synthesis to Molecular Modeling. **The Journal of Physical Chemistry A**, v. 129, n. 35, p. 8148-8159, 2025.

PARCERIAS EXISTENTES EM 2025

Em 2025, o GPEM manteve e fortaleceu parcerias científicas nacionais e internacionais, especialmente nas áreas de química computacional, cristalografia, síntese de compostos orgânicos, fotofísica molecular e propriedades ópticas não lineares.

No plano internacional, destacam-se as colaborações com pesquisadores vinculados à Índia e a outros centros estrangeiros, especialmente a cooperação com Prof. Krishna Murthy Potla, Suneetha Vankayalapati, Raja Murugesan, Zainab M. Almarhoon, Mahboob Alam, Mohammad Shahidul Islam, Sujoy Karmakar, Subham Dey, Subir Podder e Abhik Chatterjee, refletidas nas publicações em *New Journal of Chemistry* e *Journal of Molecular Structure*. Permanecem também registradas as parcerias com Prof. Md. Serajul Haque Faizi, do Langat Singh College/B. R. A. Bihar University, na Índia, e com Amani Direm, da Abbes Laghrour University, na Argélia, já vinculadas à rede internacional de colaboração do GPEM.

No plano nacional, permanecem estratégicas as parcerias com Francisco A. P. Osório, Hamilton B. Napolitano, Antônio S. N. Aguiar, Igor D. Borges, Marco A. Prazeres e demais colaboradores vinculados às linhas de modelagem molecular, cristalografia, síntese e análise de propriedades ópticas de materiais orgânicos.

Essas parcerias ampliam a capacidade do GPEM de desenvolver estudos integrados, combinando síntese, caracterização experimental, análise estrutural e modelagem computacional, além de contribuírem para a internacionalização da produção científica do grupo.

Considerando a produção científica, os projetos em andamento e a rede de colaboração consolidada em 2025, o GPEM mantém-se como um grupo ativo na investigação de materiais orgânicos de interesse tecnológico, com potencial de expansão em pesquisas aplicadas, publicações internacionais e cooperação científica interdisciplinar.